



TITLE:

## 14. 結晶構造を取り入れたThomas-Fermi-Diracモデル(修士論文アブストラクト(1982年))

AUTHOR(S):

永田, 陽一

---

CITATION:

永田, 陽一. 14. 結晶構造を取り入れたThomas-Fermi-Diracモデル(修士論文アブストラクト(1982年)). 物性研究 1983, 40(2): 205-206

ISSUE DATE:

1983-05-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/90968>

RIGHT:

## 13. 超高压発生用ダイヤモンド焼結体の合成

豊 田 周 平

従来、超高压発生用アンビル材として用いられてきた超硬合金(WC-Co)や単結晶ダイヤモンドに比べて、ダイヤモンド焼結体は強度、非へき開性、大きさなどの点でたいへん優れた特性を有する。現在入手できるダイヤモンド焼結体は切削工具や線引きダイスとしての使用を目的としたもので、超高压発生のためのアンビル材としては必ずしも適さない。本研究は超高压発生のためのダイヤモンド焼結体の合成を目的として行なわれた。

合成のための高压発生にはテーパー付ピストンシリンダー型装置を用い、実際にダイヤモンドの合成実験を行なって圧力、温度を検定した。焼結体の合成は、(i) CO粉末をダイヤモンド粉末と混ぜる方法と(ii) 周囲のWC-Co層よりCoをダイヤモンド粉末中に浸透させる2種類の方法で行なった。

(i)についてはCoの混合量を変化させて(10~20 wt%)比較した。得られた焼結体のヌープ硬度は4500~5500であった。またCo量の少ないものは均一な組織が得にくかった。(ii)についてはよく焼結したものが得られ、そのヌープ硬度は6400であった。これについてはドリッカマーセルのアンビルの形に加工し実際に圧力発生を試みた。Fe-V合金の相転移を圧力定点として圧力決定可能な限界圧である500kbarが容易に発生できた。比較のためにWC合金アンビルで圧力発生を行なったがアンビルが変形あるいは破壊して230kbarの圧力定点に達することが不可能であった。

以上の実験を基にアンビル材としてよりよい焼結体をつくるための方法について考察する。

## 14. 結晶構造を取り入れた

Thomas-Fermi-Dirac モデル

永 田 陽 一

本研究で扱うのは絶対零度の高密度物質であり、圧力の上昇に伴い電子が原子核から次々にはじきとられていく状態である。この状態を扱う理論として、今回統計的モデルのうちの

Thomas-Fermi-Dirac (T.F.D.)と呼ばれるものを選んだ。統計的モデルは、電子の波動関数を求めることなく電子密度分布が決まるため、他の方法に比べ計算が容易で速いという特徴があ

る。

ところが、これまでの計算の大部分は Wigner-Seitz cell を Wigner-Seitz 球で置き換え、球内で球対称のポテンシャルを仮定する球近似で行われていた。この球近似では球外に電場をつくらず cell 同志の相互作用がなく、結晶構造を考慮していないことになる。そこで我々の研究室では結晶構造の依存性を調べる試みとして、APW法で使われる Muffin-tin ポテンシャル近似を導入した。これは、Wigner-Seitz cell をそれに内接する球で2つの領域に分ける。球内では球対称、球外では一定のポテンシャルを仮定し、球の表面で値がつながるような電子密度分布を求めるものである。この方法から状態方程式を求めたものと、球近似から求めた状態方程式は良く一致していて、状態方程式に関しては結晶構造の依存性は小さいと考えられる。そのことを確かめるため、より正確に結晶構造を取り入れようというのが本研究である。（我々は Non Muffin-tin T. F. D. と呼んでいる） cell を Muffin-tin 近似と同じく2つに分け、球内では電子密度分布関数を cubic harmonics で展開、球外はフーリエ展開し、球の表面で傾きまでつなぐというものである。

## 15. Cu-Fe 合金のメスバウア効果による研究

山 本 松 樹

Cu-Fe 合金のメスバウア測定は、比較的古くから数多く報告されている。高温から急冷して得られる Cu-Fe 過飽和固溶体中には、単独鉄原子や鉄の小クラスターなどが形成され、焼鈍過程を通じて、そのクラスターが成長し、 $\gamma$ -Fe 析出物となり、その後、安定相の  $\alpha$ -Fe に変態する。しかしながら、析出前の過程における詳しい報告はまだない。本研究の目的は、メスバウア分光により、この時期における鉄原子小クラスターの状態とその形成過程に対する知見と無反跳分率の測定から、単独及びクラスター Fe 原子の格子振動に関する知見を得ることである。

スペクトルの解析方法は、薄膜近似を用い、ローレンツ関数の重ね合わせとして、最小二乗法による実験値との重ね合わせを基本とし、モデル計算との比較も行った。

スペクトルから鉄濃度 0.5 ~ 1.5 at. % の Cu-Fe 合金の急冷直後の鉄原子の状態として、単独 Fe, Fe-Fe 対及び Fe-Fe-Fe 等の小クラスター群が同定できた。更に、室温時効における、安定なクラスターへの移行なども観測された。この鉄原子の移動に空孔による機構を使い、反応速度論による計算を行い、急冷前の高温（900 °C）熱平衡状態の銅マトリックス